Environnement Canada Environment Canada

Institut national de recherche en hydrologie

RAPPORT Nº 37 DE L'INRH
ÉTUDE Nº 152, COLLECTION DES RAPPORTS TECHNIQUES DE LA DGEI

Procédé à différences finies en avant à pas temporels augmentant exponentiellement : la méthode des mises au carré successives

A. Vandenberg

INRH

DIRECTION GÉNÉRALE DES EAUX INTÉRIEURES ET DES TERRES
INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN HYDROLOGIE
CENTRE NATIONAL DE RECHERCHE EN HYDROLOGIE
SASKATOON (SASKATCHEWAN) 1987
(Available in English on request)

89-05527/

Publié avec l'autorisation
du ministre de l'Environnement

© Ministre des Approvisionnements et Services Canada 1987

N° de cat. En 36-503/152F

ISBN 0-662-94334-1

Table des matières

Page

RESUME..... iv

ABSTRACT..... v

INTRODUCTION..... 1

LA METHODE..... 1

EXEMPLES..... 6

EFFICACITE EN COMPARAISON AVEC LA METHODE EN AVANT STANDARD..... 12

APPLICATION AUX FORMULATIONS IMPLICITES..... 13

CONCLUSION..... 14

Illustrations

Figure 1. Notation utilisée dans l'approximation aux différences finies..... 3

Figure 2. Configuration, valeurs initiales et valeurs frontières du premier exemple..... 6

Figure 3. Configuration du deuxième exemple..... 10

Résumé

La formulation à différences finies en avant d'équations aux dérivées partielles conduit à l'équation matricielle

$$u^{n+1} = Au^n + c$$

dans laquelle la matrice A et le vecteur c sont des constantes, tandis que l'équation différentielle et les conditions limites ne possèdent pas de coefficients dépendant du temps. Par un artifice simple, cette équation peut s'écrire

$$u^{n+1} = A^* u^n$$

après quoi, à la $m^{ième}$ mise au carré successive de A*, la valeur de u est calculée au moment égal à 2^m fois le pas temporel initial.

Abstract

The forward finite difference formulation of linear partial differential equations leads to the matrix equation

$$u^{n+1} = Au^{n} + c$$

in which the matrix A and the vector c are constant whenever the differential equation and boundary conditions have no time-dependent coefficients. By a slight artifice, this equation can be changed to

$$u^{n+1} = A^{*}\, u^{n}$$

after which, on the m^{th} successive squaring of A^{*}, the value of u is calculated at a time that is 2^{m} times the original time step.

Procédé à différences finies en avant à pas temporels augmentant exponentiellement : la méthode des mises au carré successives

A. Vandenberg

INTRODUCTION

De toutes les méthodes de résolution numérique d'un système d'équations aux dérivées partielles. la méthode à différences finies en avant est la plus simple, puisque les valeurs de la variable indépendante aux noeuds spatiaux après un pas temporel Δt sont calculées explicitement à partir des valeurs connues avant le pas temporel, ce qui élimine la nécessité de résoudre simultanément les équations pour tous les noeuds, comme c'est le cas pour les méthodes implicites. La méthode en avant a cependant été abandonnée puisque le pas temporel doit toujours être gardé sous un certain seuil critique maximal pour que la méthode demeure stable. Il sera montré dans la présente étude que pour certains types de problèmes aux limites à équations différentielles linéaires, il est possible d'augmenter la grandeur du pas de la formulation à différences finies en avant d'un facteur deux à chacune des itérations.

LA METHODE

On se servira de l'équation parabolique dans l'espace bidimensionnel pour élaborer la méthode, bien que celle-ci puisse également être appliquée à d'autres types d'équations linéaires:

$$\partial u/dt = \alpha(x,y)\partial^2 u/\partial x^2 + \beta(x,y)\partial^2 u/\partial y^2 + \gamma(x,y) \qquad (1)$$

Un ensemble de conditions aux limites est établi pour cette équation:

$$u = U(x,y) \text{ à } \Gamma_1 \tag{2a}$$

$$du/ds = \delta(x,y) \text{ à } \Gamma_2 \tag{2b}$$

$$c_1 u + c_2 du/ds = \varepsilon(x,y) \text{ à } \Gamma_3 \tag{2c}$$

dans lesquelles du/ds = la dérivée dans la direction normale à la frontière Γ_2 ou Γ_3, c_1 et c_2 sont des constantes, et α, β, γ, δ, ε et U doivent être indépendantes du temps.

Dans la méthode à différences finies en avant, l'équation 1 est remplacée par son approximation aux différences finies:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^{n} + l_{i,j}\,(u_{i-1,j}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i+1,j}^{n}) + k_{i,j}\,(u_{i,j-1}^{n} - 2\,u_{i,j}^{n} + u_{i,j+1}^{n}) + \gamma'_{i,j} \tag{3}$$

dans laquelle

$$l_{i,j} = \alpha_{i,j}\,\Delta t/\Delta x^2$$
$$k_{i,j} = \beta_{i,j}\,\Delta t/\Delta x^2$$
$$\gamma'_{i,j} = \gamma_{i,j}\,\Delta t$$

L'indice supérieur n indique la valeur de u au moment $t = n\Delta t$ et les indices inférieurs i et j désignent la valeur de la variable à l'intersection, dans le plan x-y, de la $i^{ième}$ ligne (grille verticale) et de la $j^{ième}$ ligne (grille horizontale) de la grille de différences finies (figure 1).

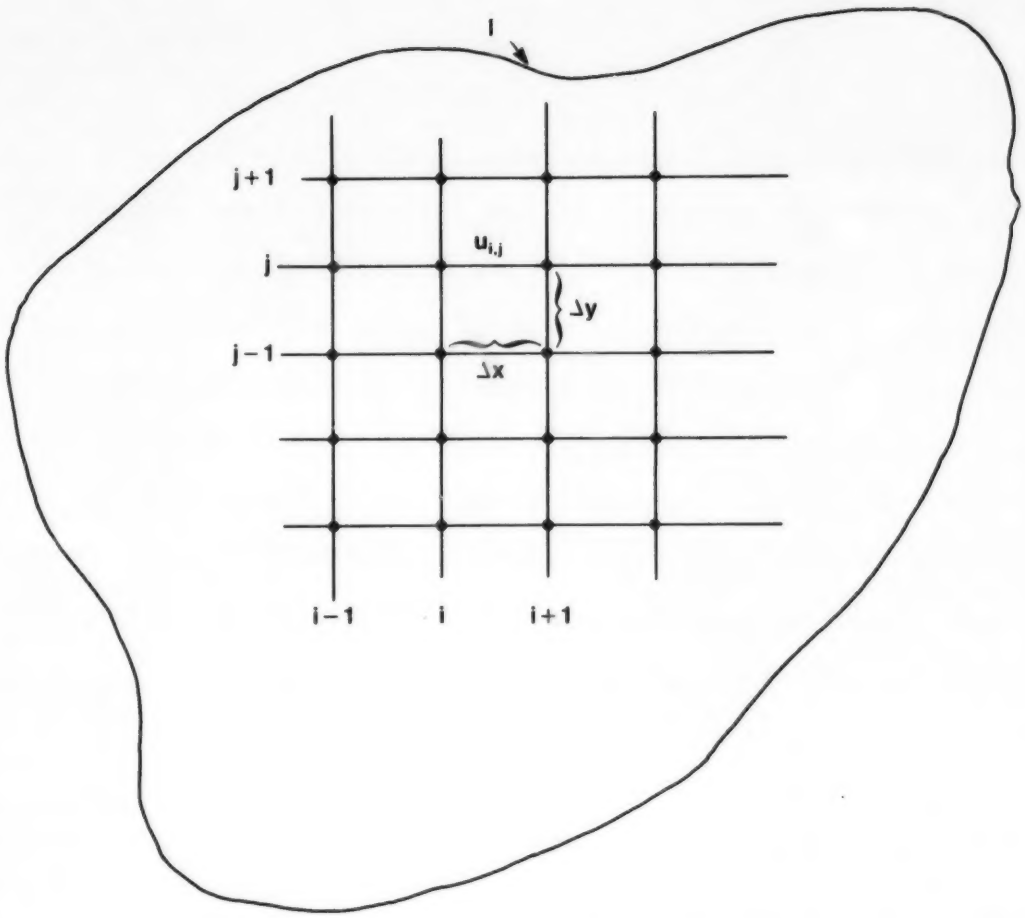

Figure 1. Notation utilisée dans l'approximation aux différences finies.

L'équation 3 est alors appliquée à chacune des intersections (noeuds) à tour de rôle, exception faite des noeuds situés à la frontière Γ_1 qui sont de valeur constante. Les conditions limites du type (2b) et du type (2c) sont remplacées par des approximations à différences finies grâce auxquelles la valeur de u au noeud frontière est exprimée en terme des valeurs aux noeuds internes voisins.

Une itération, qui fait progresser la solution en avant dans le temps de $t = n\Delta t$ à $t = (n+1)\Delta t$, s'exprime alors en notation matricielle au moyen de l'équation:

$$u^{n+1} = Au^n + c \tag{4}$$

dans laquelle u^n et u^{n+1} sont les vecteurs des valeurs nodales de u respectivement aux moments $t = n\Delta t$ and $t = (n+1)\Delta t$, à tous les m noeuds où u n'est pas constante. A est la matrice m x m résultant de l'application de l'équation 3 à tous les noeuds intérieurs à tour de rôle, les noeuds frontières non constants étant remplacés, s'ils apparaissent, par des expressions appropriées obtenues de (2b) et (2c); c est le vecteur des termes constants dérivant du terme $\gamma'_{i,j}$ de l'équation 3 et des valeurs aux frontières constantes à Γ_1.

Ainsi, en commençant avec n = 0, on calcule à partir de u°, le vecteur des conditions initiales:

$$\begin{aligned}
u^1 &= u(\Delta t) = Au^\circ + c \\
u^2 &= u(2\Delta t) = Au^1 + c = A^2u^\circ + Ac + c \\
u^3 &= u(3\Delta t) = A^3u^\circ + A^2c + Ac + c \\
u^n &= u(n\Delta t) = A^nu^\circ + c \sum_{i=0}^{n-1} A^i
\end{aligned} \tag{5}$$

Cependant la somme apparaissant dans (5) représente un effort de calcul dont on peut bien se dispenser, et il serait de beaucoup préférable d'avoir, plutôt que l'équation 5, une équation de la forme

$$u^n = A^nu^\circ \tag{6}$$

ou, en général,

$$u^{k+n} = A^nu^k \tag{7}$$

car alors il vient

$$u^2 = u(2\Delta t) = A^2 u^\circ$$
$$u^4 = u(4\Delta t) = A^4 u^\circ$$

etc.; les mises au carré successives de A permettraient alors de calculer u aux moments $t = \Delta t,\ 2\Delta t,\ 4\Delta t$, ou, de façon générale, au moment $t = 2^n \Delta t$ à la $n^{ième}$ itération.

Il est possible d'obtenir une équation du type (7) à partir de l'équation 4 en introduisant une variable liée supplémentaire, $\bar{u}$, comme étant le $(m+1)^{ième}$ élément de u, et en assignant à $\bar{u}$ la valeur constante:

$$\bar{u} = 1$$

L'équation 4 peut alors s'écrire

$$u^{n+1} = A^* u^n \qquad (8)$$

dans laquelle

$$A^* = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & c_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & c_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_m a_m & c_m \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} A & c \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right]$$

La matrice contient maintenant (dernière colonne) le vecteur des constantes c qu'on interprète maintenant comme étant le vecteur des coefficients de la variable liée $\bar{u}$ dans l'équation matricielle 8. La dernière rangée de la matrice exprime le fait que:

$$\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^{n}$$

c'est-à-dire que $\bar{u}$ est une constante.

Ainsi sont satisfaites toutes les conditions permettant de résoudre l'équation 3 au moyen d'une méthode des mises au carré successives. Cette méthode sera illustrée au moyen de deux exemples.

EXEMPLES

Dans le premier exemple, on cherche à résoudre l'équation 1 dans le domaine montré à la figure 2; la fonction u est constante sur toute la frontière, ses valeurs étant données à la figure 2. Les valeurs initiales aux trois noeuds internes sont également données entre parenthèses à la même figure. Il n'existe pas de terme source ni de terme puits: γ est nul partout. Manifestement la solution tend vers

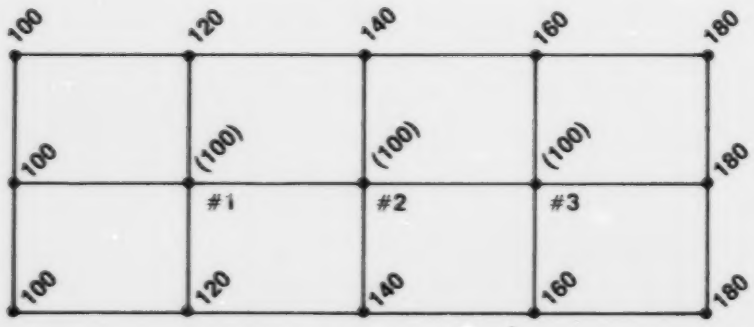

Figure 2. Configuration, valeurs initiales et valeurs frontières du premier exemple.

un état permanent, u_1, u_2, et u_3 étant égales respectivement à 120, 140, et 160.

En posant $l_{i,j}$ et $k_{i,j}$ égaux à 0.2 à tous les noeuds, on réduit l'équation 3 à l'ensemble des trois équations:

$$u_1^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2\ (100 + 120 + 120)$$

$$u_2^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 0.2\ (140 + 140)$$

$$u_3^{n+1} = 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 0.2\ (180 + 160 + 160)$$

qui avec l'introduction de $\bar{u}$ devient l'ensemble des quatre équations:

$$u_1^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 68\ \bar{u}$$

$$u_2^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 56\ \bar{u}$$

$$u_3^{n+1} = 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 100\ \bar{u}$$

$$\bar{u} = \bar{u}$$

qui peuvent également s'inscrire sous la forme matricielle:

$$u^{n+1} = A*u^n$$

dans laquelle

$$A = \begin{bmatrix} .2 & .2 & 0 & 68 \\ .2 & .2 & .2 & 56 \\ 0 & .2 & .2 & 100 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La mise au carré successive de A* donne:

$$A^{*2} = \begin{bmatrix} .08 & .08 & .04 & 92.8 \\ .08 & .12 & .08 & 100.8 \\ .04 & .08 & .08 & 131.2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^{*4} = \begin{bmatrix} .014 & .019 & .013 & 113.54 \\ .019 & .027 & .019 & 130.82 \\ .013 & .019 & .014 & 153.47 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$A^{*8} = \begin{bmatrix} .00074 & .00104 & .00074 & 119.65 \\ .00104 & .00148 & .00104 & 139.50 \\ .00074 & .00104 & .00074 & 159.65 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^{*16} = \begin{bmatrix} - & - & - & 120.0 \\ - & - & - & 140.0 \\ - & - & - & 160.0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Les éléments des puissances de A* convergent donc tous vers zéro, exception faite des éléments de la dernière colonne qui représentent la solution en régime permanent du problème. Cette forme finale est typique de tous les problèmes qui parviennent à un état permanent au moment $t \to \infty$. On peut noter que la mise au carré supplémentaire de A^{*16} n'a pratiquement aucun effet, c'est-à-dire que pour un grand n

$$A^{*2n} \sim A^{*n}$$

De la même manière, les conditions initiales n'ont aucune influence sur la solution en régime permanent qui est déterminée totalement par les conditions aux frontières.

Il y a lieu également de souligner l'existence des matrices inverses de A et A*, A^{-1} et A^{*-1}. De l'équation 4 il vient

$$u^n = A^{-1} (u^{n+1} - c) \qquad (9)$$

et de l'équation 8

$$u^n = A^{*-1}\, u^{n+1} \tag{10}$$

L'une ou l'autre de ces équations peut servir à remonter dans le temps et il n'y a aucune raison interdisant de remonter au-delà du moment t = 0. L'équation 10 permet cette démarche par la mise au carré successive à vitesse de plus en plus grande. Il faut cependant noter que les puissances élevées de A^*, par exemple A^{*16}, sont de plus en plus mal conditionnées. Plus la solution s'approche donc de l'état permanent, la précision avec laquelle il est possible de retrouver les états antérieurs est de moins en moins grande.

En poursuivant l'évaluation de la solution de l'exemple, nous calculons

$$A^{*-1} = \begin{bmatrix} 0 & 5 & -5 & 220 \\ 5 & -5 & 5 & -560 \\ -5 & 5 & 0 & 60 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

et obtenons ainsi

$$u^{-1} = u\,(t = -\Delta t) = A^{*-1}\, u^{\circ}$$
$$u^{-2} = u\,(t = -2\Delta t) = A^{*-1}\, u^{-1}$$
$$u^{-3} = u\,(t = -3\Delta t) = A^{*-1}\, u^{-2}$$

ce qui donne

$$u^{-1} = \quad 220, \quad -60, \quad +60$$
$$u^{-2} = \quad -380, \quad +1140, \quad -1340$$
$$u^{-3} = +12620, \; -14860, \; +7660$$

Par conséquent, bien que mathématiquement fondées, ces «solutions» au moment négatif t perdent rapidement tout sens physique, dans ce cas.

Dans le deuxième exemple, le résultat est illustré lorsque le système ne converge pas vers un état permanent, comme c'est le cas par exemple pour la configuration de la figure 3, dans laquelle la frontière est du type «sans flux transversant», c'est-à-dire que

$$du/ds = 0 \qquad \text{à } \Gamma$$

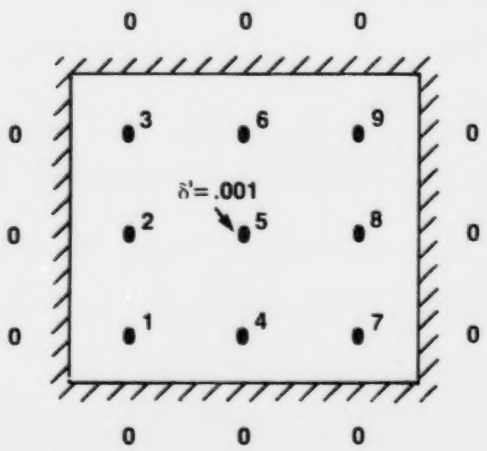

Figure 3. Configuration du deuxième exemple.

Ainsi, par exemple, les deux noeuds virtuels à l'extérieur de la frontière et opposés au noeud n° 1 à l'intérieur de la région, ont même valeur que le noeud n°1, à tout moment. De plus, il existe une source constante, $\gamma' = .001$, au noeud n°5, au centre. En posant à nouveau $l_{i,j}$ et $k_{i,j}$ égaux à 0.2, l'équivalent de l'équation 3 devient

$$u^{n+1}_{i,j} = 0.2\,(u^{n}_{i-1,j} + u^{n}_{i+1,j} + u^{n}_{i,j-1} + u^{n}_{i,j+1} + u^{n}_{i,j}) + \gamma' \qquad (11)$$

En appliquant l'équation 11 à chacun des neuf noeuds internes de la figure 3, on obtient la matrice **A***:

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} .6 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ .2 & .4 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .2 & .6 & 0 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ .2 & 0 & 0 & .4 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .2 & 0 & .2 & .2 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0.001 \\ 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .4 & 0 & 0 & .2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & 0 & .6 & .2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .4 & .2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Après quelques mises au carré successives, cette matrice prend la forme

$$\mathbf{A}^{*32} = \begin{bmatrix} .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00467 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Cette matrice $\mathbf{A}^{*32}$ représente un régime quasi permanent dans lequel la forme de la surface représentant u ne change pas, mais dont le niveau s'élève uniformément à vitesse constante. On peut considérer que la solution complète, quand t est grand, se compose de deux parties: 1) une partie individuelle, caractéristique de chacun des noeuds, qui augmente régulièrement puisqu'elle est le résultat de la source présente au noeud 5 (cette partie est contenue dans la dernière colonne et est donc indépendante des conditions initiales); 2) une partie, la même pour tous les noeuds, qui est la moyenne des valeurs initiales, dans ce cas

1/9 (.111) fois la somme de toutes les valeurs nodales à l'instant t = 0; cette partie représente donc «ce qui était présent dans le seau» au début et qui s'y trouve encore, mais distribué uniformément sur tous les noeuds.

EFFICACITE EN COMPARAISON AVEC LA METHODE EN AVANT STANDARD

Bien que l'emploi de pas temporels à croissance exponentielle dans la méthode des mises au carré successives semble, à première vue, améliorer considérablement l'efficacité du calcul, la méthode présente l'inconvénient de compter un grand nombre d'opérations par pas temporels. Dans la méthode à différences finies en avant standard, le nombre d'additions et le nombre de multiplications est d'environ 3 m, 5 m ou 7 m par pas temporels, respectivement pour des problèmes unidimensionnels, bidimensionnels et tridimensionnels, m étant le nombre de noeuds. Pour faire progresser la solution au moment $t = 2^n\Delta t$, il faut donc $pm2^n$ multiplications, où p = 3, 5, ou 7, et approximativement le même nombre d'additions.

Dans la méthode des mises au carré successives, les éléments de la matrice (m+1)m (excluant ceux de la dernière rangée qui ne changent pas) doivent être calculés au moyen de (m+1) additions et du même nombre de multiplications par éléments par mise au carré. Enfin, pour calculer le vecteur u à chaque pas, il faut m(m+1) multiplications supplémentaires et le même nombre d'additions.

Ainsi, dans cette méthode, pour n itérations, c'est-à-dire pour l'instant $t = 2^n\Delta t$, il faut au total $n[(m+1)^2m + m(m+1)] = nm(m+1)(m+2)$ additions et le même nombre de multiplications. C'est

seulement si

$$(m+1)(m+2) < p\ 2^n/n$$

que la méthode des mises au carré successives est plus efficace que la méthode en avant standard. Pour un problème bidimensionnel avec n = 10, c'est-à-dire que les dernières valeurs calculées l'ont été au moment $t = 1024\ \Delta t$, le nombre de noeuds doit être inférieur à 21, et avec 40 noeuds les solutions doivent être projetées en avant au moins jusqu'à l'instant $t = 8192\ \Delta t = 2^{13}\Delta t$ pour que la méthode soit plus efficace.

APPLICATION AUX FORMULATIONS IMPLICITES

Les méthodes à différences finies implicites peuvent être exprimées sous la forme matricielle:

$$Au^{n+1} = Bu^n + c \qquad (12)$$

De nouveau, si le vecteur c et les matrices A et B sont invariants, l'équation 12 peut être multipliée par la matrice A^{-1}, l'inverse de A:

$$u^{n+1} = A^{-1} Bu^n + A^{-1}c$$

ou

$$u^{n+1} = Du^n + d \qquad (13)$$

dans lesquelles

$$D = A^{-1}B$$

et

$$d = A^{-1}c$$

L'équation 13 peut être développée sous la forme

$$u^{n+1} = D^* u^n$$

dans laquelle

$$D^* = \left[\begin{array}{c|c} D & d \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right]$$

La méthode des mises au carré successives peut donc aussi être appliquée à des formulations implicites.

CONCLUSION

Bien qu'elle ait été décrite ici pour la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles donné et pour son approximation à différences finies en avant, la méthode des mises au carré successives peut également être appliquée à tous les types d'équations dans lesquelles l'approximation finie peut être exprimée au moyen de l'équation matricielle

$$Au^{n+1} = Bu^n + c$$

pourvu que les matrices A et B ainsi que le vecteur c soient indépendants du temps, et que la matrice inverse A^{-1} de A existe. Ces exigences limitent clairement la méthode aux équations différentielles linéaires.

La méthode est efficace uniquement après un certain nombre d'itérations, ce nombre s'accroissant avec le nombre de noeuds.

Par ailleurs, il a été montré qu'il est possible d'inverser les pas temporels pour remonter dans le temps, pour qu'à partir d'un état observé il soit possible de reconstituer l'état antérieur qui lui a donné naissance. Un examen plus attentif de cette possibilité peut cependant révéler que ce type de «recherche historique» ne mène pas à grand chose, par suite des erreurs d'arrondi.